

## СЕКЦІЯ 1: Нанoeлектроніка

**МОДЕЛИРОВАНИЕ РОСТА ГЦК КРИСТАЛЛА ИЗ ГАЗОВОЙ  
ФАЗЫ**Спесивый А.С., *студент*

Оптимальные формы наноструктур чрезвычайно важны для таких разнообразных прикладных применений как зарядные устройства, конденсаторы, топливные ячейки и прочее.

Целью представленной работы является определение основных принципов получения наноструктур заданной формы и контроля над ней. Рассматриваемая численная модель основана на методах, родственных с методом Монте-Карло, который, используя положения статистической физики, позволяет сократить аппаратные и вычислительные затраты на компьютерный эксперимент.

Исследуемая система представляет собою замкнутое кубическое пространство с периодичными условиями на границах. В центре его находится зародышевое зерно – небольшой кластер с ГЦК структурой, а объем заполнен хаотично движущимися атомами. Входными параметрами системы является начальная концентрация атомов и температура в моделируемой системе. Варьируя эти параметры можно получить различные габитусы кристаллов.

В результате проведенных экспериментов было обнаружено, что наиболее ровные и правильные грани кристаллов получаются при повышенных температурах и малых начальных концентрациях. Подобные условия близки к равновесным. Также было выяснено, что разнообразие кристаллографических плоскостей, ограничивающих грани кристалла, возрастает при учете соседей второго и далее порядков.

Руководитель: Перекрестов В.И., *профессор*

1. А.А. Чернов, *Современная кристаллография*. Т.3 (Москва: Наука: 1980).
2. С.М. Ермаков, *Метод Монте-Карло и смежные вопросы* (Москва: Наука: 1975).